

УДК 621.317.329:51-74

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИСТАНЦИОННОЙ ЗАВИСИМОСТИ РАЗРЕШАЮЩЕЙ СПОСОБНОСТИ СКАНИРУЮЩЕГО ЗОНДА КЕЛЬВИНА

Тявловский А.К.

Белорусский национальный технический университет, г. Минск, Республика Беларусь

Предложена математическая модель формирования выходного сигнала сканирующего зонда Кельвина с цилиндрическим чувствительным элементом при сканировании поверхности образца, содержащей дефекты, представленные точечными зарядами. Приведены результаты моделирования для случая двух близкорасположенных точечных зарядов при различных соотношениях диаметра чувствительного элемента сканирующего зонда Кельвина и зазора «зонд-образец». Показано, что наиболее эффективным путем повышения разрешающей способности сканирующего зонда Кельвина является уменьшение расстояния между чувствительным элементом и поверхностью исследуемого образца при уменьшении амплитуды вибрации чувствительного элемента.

(E-mail: andrey_psf@tut.by)

Ключевые слова: зонд Кельвина, разрешающая способность, метод изображений, электрический заряд.

Введение

Метод сканирующего зонда Кельвина применяется для построения карт пространственного распределения поверхностного потенциала или работы выхода электрона (р.в.э.) различных поверхностей (в первую очередь, проводящих и полупроводниковых) [1]. Благодаря высокой чувствительности метода, обеспечивается обнаружение дефектов с характерными размерами порядка единичных атомных кластеров, т.е. соизмеримых с обнаруживаемыми атомно-силовой микроскопией [2]. В то же время открытым остается вопрос пространственной локализации выявленных дефектов, возможности которой ограничиваются пространственной разрешающей способностью сканирующего зонда [3, 4].

Математическое моделирование разрешающей способности сканирующего зонда Кельвина ранее выполнено Г.Н. МакМюрреем и Г. Уильямсом [5], использовавшими при разработке математической модели широко применяемый в электростатике метод изображений [6]. Однако в работе [5] анализировался только один, наиболее простой, модельный случай (скачок потенциала на границе двух полуплоскостей, характеризующихся различными значе-

ниями поверхностной плотности заряда). Следует также отметить, что в модели МакМюррея и Уильямса не учитывались реальные физические размеры чувствительного элемента сканирующего зонда Кельвина, что, с одной стороны, упростило расчеты, с другой – наблюдавшееся авторами различие между результатами математического моделирования и реального эксперимента потребовало введения эмпирической «поправки на диаметр зонда» [5]. При этом математическая модель МакМюррея и Уильямса непригодна для случая дефектов, геометрические размеры которых меньше геометрических размеров зонда.

В данной работе рассматривается наиболее характерный для зондовой электрометрии случай точечных дефектов поверхности, характерные линейные размеры которых много меньше размеров чувствительного элемента зонда. Проанализирована возможность отдельного обнаружения и пространственной локализации двух близко расположенных дефектов при различных соотношениях размеров чувствительного элемента зонда Кельвина, зазора «зонд-образец» и расстояния между дефектами, а также влияние отношения сигнал/шум измерительного преобразователя на его разрешающую способность.

Методика исследования

С позиции электрометрических методов контроля точечный дефект поверхности образца проявляет себя как избыточный заряд q_j , присутствующий в некоторой точке поверхности. Поверхности образца и чувствительного элемента зонда Кельвина формируют две обкладки конденсатора, одна из которых (зонд) имеет много меньшую площадь, чем другая (образец). Совокупность зарядов q_j всех дефектов поверхности образца создает на поверхности чувствительного элемента некоторый наведенный заряд q . Метод Кельвина–Зисмана предусматривает наложение на одну из обкладок (как правило, зонд) механических колебаний в направлении, перпендикулярном поверхности образца. В случае если амплитуда колебаний d_m много меньше расстояния между обкладками d , электрическая емкость C динамического конденсатора Кельвина будет изменяться периодическим образом, что приведет к модуляции напряжения на конденсаторе в соответствии с выражением [7]:

$$\begin{aligned} u \, t &= \frac{q}{C \, t} = \frac{q}{C_0} \left(1 + \frac{d_m}{d} \sin \omega t \right) = \\ &= q \frac{1}{C_0} + q \frac{m}{C_0} \sin \omega t, \end{aligned} \quad (1)$$

где C_0 – статическая емкость конденсатора Кельвина при нейтральном положении вибрирующей обкладки; ω – круговая частота вибрации вибрирующей обкладки; $m = \frac{d_m}{d}$ – коэффициент модуляции динамического конденсатора Кельвина.

На практике, как правило, используется компенсационный метод измерений, при котором амплитуда переменной составляющей в выражении (1) приводится к нулю за счет приложения между зондом и образцом внешнего напряжения [8]. Из (1) видно, что переменная составляющая выходного сигнала при этом оказывается пропорциональной как заряду q , так и коэффициенту модуляции m .

Для оценки разрешающей способности сканирующего зонда Кельвина рассмотрим случай двух точечных дефектов, разделенных расстоянием l (рисунок 1). Пусть первый дефект имеет заряд q_1 , а второй – заряд q_2 .

Моделируемый чувствительный элемент сканирующего зонда Кельвина представляет

собой вертикальный цилиндрический стержень с плоской торцевой поверхностью, параллельной поверхности исследуемого образца. Такая конструкция является наиболее типичной для измерителей, реализующих метод Кельвина–Зисмана [1]; кроме того, результаты моделирования в этом случае сравнительно легко могут быть распространены и на случай заостренного («игольчатого») зонда Кельвина, площадь торцевой поверхности которого стремится к нулю. Последний, в частности, используется при реализации режима зонда Кельвина в атомно-силовой микроскопии [2–4].

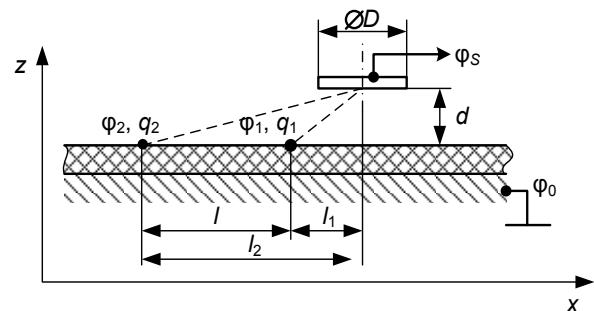


Рисунок 1 – Модель взаимодействия двух точечных зарядов с зондом Кельвина

Обозначим диаметр торцевой поверхности зонда D , а расстояние между зондом и поверхностью образца – d . Для упрощения анализа будем считать диэлектрическую проницаемость среды в зазоре между зондом и образцом и, соответственно, емкость C_0 , одинаковой в пределах всей области исследования.

Расстояние от оси симметрии чувствительного элемента до заряда q_1 обозначим l_1 , а до заряда q_2 – l_2 . Для упрощения анализа рассмотрим случай, когда заряды q_1 , q_2 и проекция оси симметрии чувствительного элемента на плоскость образца лежат на одной прямой, вдоль которой и осуществляется сканирование.

В этом случае заряд чувствительного элемента зонда Кельвина можно найти, используя метод изображений [6]. В соответствии с этим методом электрическое поле на поверхности проводника рассматривается как результат взаимодействия двух зарядов – реального, расположенного по одну сторону от проводящей поверхности, и его виртуального зеркального изображения, находящегося симметрично реальному относительно проводящей поверхности. При такой конфигурации зарядов вектор

напряженности электрического поля у поверхности, т.е. не будет иметь составляющей, направленной вдоль поверхности. Это соответствует условию эквипотенциальности поверхности проводника, согласно которому между отдельными точками поверхности проводника, находящегося в статическом электрическом поле, не может существовать разности потенциалов, которая в противном случае приводила бы к перемещению свободных носителей заряда вдоль поверхности, т.е. к генерации электрического тока, что противоречит закону сохранения энергии.

Плотность наведенного заряда в произвольной точке эквипотенциальной проводящей плоскости в этом случае рассчитывается по формуле [6]:

$$\sigma = \sigma_1 + \sigma_2 = -\frac{q_1 \cdot d}{2\pi l_1^2 + d^2^{\frac{3}{2}}} - \frac{q_2 \cdot d}{2\pi l_2^2 + d^2^{\frac{3}{2}}}, \quad (2)$$

где σ_1 – плотность наведенного заряда, создаваемого точечным зарядом q_1 ; σ_2 – плотность наведенного заряда, создаваемого точечным зарядом q_2 .

В соответствии с принципом суперпозиции, плотности наведенного заряда σ_1 и σ_2 складываются арифметически.

Выражение (2) предполагает бесконечный размер проводящей плоскости. В соответствии с требованием эквипотенциальности, оно справедливо и для плоской торцевой поверхности рассматриваемого чувствительного элемента зонда Кельвина, представляющей собой ограниченный участок такой плоскости. Следует отметить, что при таком рассмотрении не учитываются краевые эффекты, связанные с наведенным электрическим зарядом на боковой поверхности зонда. В то же время в литературе традиционно принимается, что электрическая емкость между поверхностью образца и боковой поверхностью зонда Кельвина приблизительно на порядок меньше, чем емкость «поверхность образца – торцевая поверхность зонда» [9]. Таким образом, рассматриваемый модельный случай в первом приближении можно считать справедливым.

Суммарный наведенный заряд торцевой поверхности чувствительного элемента зонда

проводника будет перпендикулярен по Кельвина можно определить, проинтегрировав выражение для плотности наведенного заряда (2) по всей ее площади. Расстояние от заряда q_1 до проекции A произвольной точки торцевой поверхности чувствительного элемента зонда Кельвина на плоскость расположения зарядов можно вычислить, воспользовавшись теоремой косинусов (рисунок 2):

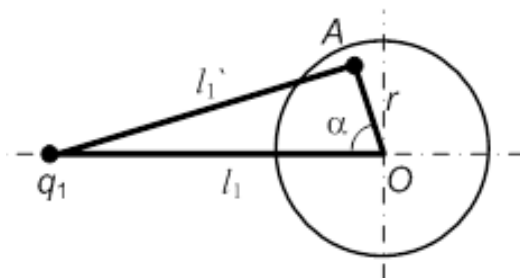


Рисунок 2 – К расчету расстояния от заряда q_1 до произвольной точки проекции торцевой поверхности чувствительного элемента зонда Кельвина

$$l_1' = \sqrt{l_1^2 + r^2 - l_1 r \cos \alpha}, \quad (3)$$

где $r \in (0 \dots \frac{D}{2})$ – расстояние от точки до центра проекции торцевой поверхности чувствительного элемента O ; $\alpha \in (0 \dots 2\pi)$ – угол между отрезками Oq_1 и OA , соединяющими центр проекции торцевой поверхности чувствительного элемента с точкой расположения заряда (отрезок длиной l_1) и проекцией рассматриваемой произвольной точки (отрезок длиной r).

Аналогичным образом вычисляется расстояние l_2' от точки A до заряда q_2 . Подставляя значения l_1' и l_2' из (3) в (2), получим:

$$\sigma = \sigma_1 + \sigma_{21} = -\frac{q_1 \cdot d}{2\pi l_1^2 + r^2 - l_1 r \cos \alpha + d^2^{\frac{3}{2}}} - \frac{q_2 \cdot d}{2\pi l_2^2 + r^2 - l_2 r \cos \alpha + d^2^{\frac{3}{2}}}. \quad (4)$$

На основании (4) суммарный наведенный заряд на поверхности чувствительного элемента в принятой модели можно найти из выражения:

$$q = -\frac{d}{2\pi} \int_0^{\frac{D}{2}} \int_0^{2\pi} \left(\frac{q_1}{l_1^2 + r^2 - l_1 r \cos \alpha + d^2^{\frac{3}{2}}} + \frac{q_2}{l_2^2 + r^2 - l_2 r \cos \alpha + d^2^{\frac{3}{2}}} \right) \partial \alpha \partial r. \quad (5)$$

Как следует из рисунка 1, величины l_1 и l_2 связаны соотношением $l_2 = l_1 + l$. Таким образом, задавшись значениями q_1 , q_2 , l и d , из выражения (5) можно получить (в графическом или аналитическом виде) зависимость $q(l)$, отражающую, в соответствии с (1), изменение выходного сигнала зонда Кельвина в процессе сканирования поверхности, содержащей точечные заряды q_1 и q_2 .

Результаты исследования

Поскольку цели моделирования не были связаны с воспроизведением конкретного объекта, все значения параметров модели (5) выражались в условных единицах. Подобный подход, в частности, использовался Г.Н. МакМюрреем и Г. Уильямсом [5]. Для наглядности в качестве модельного далее рассматривается случай, когда два близко расположенных заряда имеют одну и ту же величину. Для удобства представления графиков, с учетом противоположного знака наведенного заряда q , значение каждого из зарядов было принято равным -1 .

Диаметр чувствительного элемента D был принят равным 1, расстояние d между торцевой поверхностью чувствительного элемента и поверхностью образца $-0,1$ ($D:d = 10$). Моделирование процесса сканирования поверхности с дефектами по координате x осуществлялось путем вычисления выражения (5) как функции от расстояния l_1 (последнее при построении графиков варьировалось от -2 до $+2$). Были построены графики координатной зависимости выходного сигнала сканирующего зонда Кельвина для случаев расстояния l между зарядами, равного 0; 0,2; 0,4; 0,6; 0,8 и 1 (т.е. от 0 до D). Полученные графики изменения выходного сигнала сканирующего зонда Кельвина приведены на рисунке 3. Для большей наглядности на рисунке 4 те же графики приведены в трехмерном виде, как функция зависимости выходного сигнала зонда Кельвина от координаты x и расстояния l (плавно изменяющегося от 0 до D).

Из рисунков 3 и 4 видно, что в случае $D \gg \gg d$ (зазор много меньше линейных размеров чувствительного элемента) точечный заряд оказывает влияние на сигнал зонда Кельвина уже на расстоянии, равном D . Максимум сигнала, как и следовало ожидать, имеет место при нахождении одного из зарядов на оси чувствительного элемента. Интересно, что локальные

максимумы сигнала при прохождении сканирующего зонда над точечными зарядами имеют ярко выраженный «острый» характер даже при отношении расстояния между ними к диаметру зонда $l:D = 0,2$.

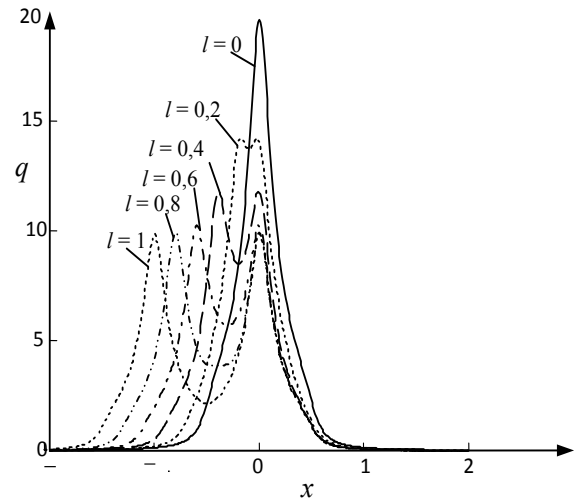


Рисунок 3 – Зависимость выходного сигнала сканирующего зонда Кельвина от координаты для различных значений расстояния между зарядами (случай $D \gg d$)

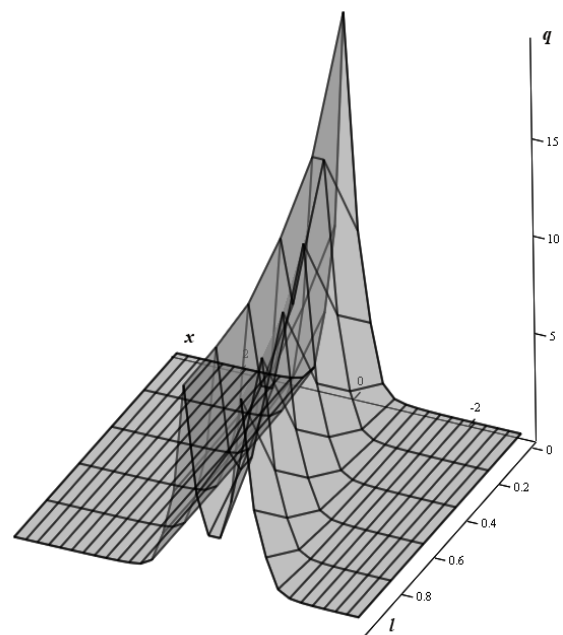


Рисунок 4 – Трехмерная зависимость выходного сигнала сканирующего зонда Кельвина от координаты x и расстояния между зарядами l (случай $D \gg d$)

Из результатов моделирования следует, что при расстоянии между зарядами, равном или большем $0,8 D$, величина максимума сигнала, создаваемого каждым из точечных заря-

дов, практически не зависит от расстояния дельных зарядов, представляющих отдельные точечные дефекты, оказываются разделены. При меньшем расстоянии явно проявляется эффект усреднения сигнала от нескольких дефектов, попадающих в площадь проекции чувствительного элемента, неоднократно описанный в литературе [9, 10]. Максимальное значение сигнала, равное удвоенному значению сигнала от единичного заряда, как и следовало ожидать, наблюдается при совпадении двух дефектов ($l = 0$), что эквивалентно наличию одного заряда величиной $q_1 + q_2$.

Если целью сканирования является выявление деталей потенциального рельефа, а не определение абсолютной величины поверхностного заряда или р.в.э., то достаточным условием для разрешения двух близко расположенных дефектов является отличие величины локального минимума функции (5) от соседнего максимума на величину, превышающую уровень шумов измерительного преобразователя. Так, при выбранных параметрах модели и расстоянии между дефектами, равном $0,2 D$, отношение максимума функции к ее минимуму составляет 1,022. Отсюда следует, что данные дефекты могут быть разрешены уже при использовании преобразователя с отношением сигнал/шум, равным 33 дБ. Применение преобразователя с отношением сигнал/шум 80 дБ позволяет разрешать дефекты, отстоящие друг от друга на расстояние $0,001 D$.

Поскольку параметр d входит в модель (5) в третьей степени, очевидно, расстояние между чувствительным элементом и поверхностью образца будет являться одним из основных факторов, ограничивающих разрешающую способность сканирующего зонда Кельвина. Для проверки этого положения было проведено моделирование случая $d = 1$, т.е. зазор был принят равным диаметру чувствительного элемента зонда Кельвина. Остальные параметры модели были оставлены без изменений. Результаты моделирования случая большого зазора приведены на рисунке 5.

Из рисунка 5 следует, что при величине зазора d , равной диаметру зонда D , два дефекта, отстоящие друг от друга также на расстояние D или менее, не могут быть разрешены как отдельные объекты при любом отношении сигнал/шум преобразователя.

Для более наглядной демонстрации дистанционной зависимости разрешающей спо-

способности сканирующего зонда Кельвина с использованием математической модели (5) было построено семейство графиков выходного сигнала сканирующего зонда диаметром $D = 1$ при расстоянии между зарядами $l = 1$ и зазоре «зонд-образец» $d = 0,1; 0,2; 0,4; 0,6; 0,8$ и 1 , т.е. в диапазоне от случая $D \gg d$ (рисунок 3) до случая $d = D$ (рисунок 5). Результаты построения приведены на рисунке 6.

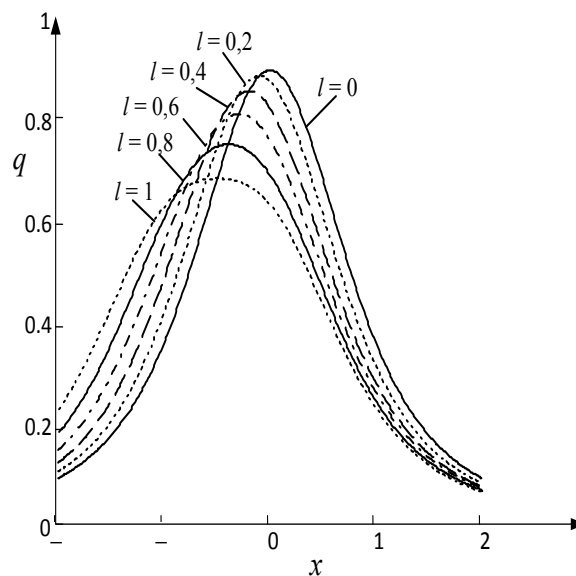


Рисунок 5 – Зависимость выходного сигнала сканирующего зонда Кельвина от координаты для различных значений расстояния между зарядами (случай зазора $d = D$)

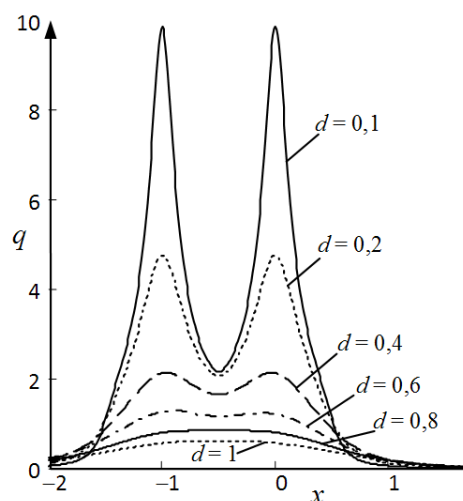


Рисунок 6 – Выходной сигнал сканирующего зонда Кельвина диаметром $D = 1$ при расстоянии между зарядами $l = 1$ и зазоре «зонд-образец» $d = 0,1; 0,2; 0,4; 0,6; 0,8$ и 1

Из рисунка 6 видно, что уже при увеличении зазора до $0,2 D$ отношение максимума сигнала к локальному минимуму падает в 2 раза по сравнению с таковым при зазоре $0,1 D$. Увеличение зазора свыше $0,6 D$ полностью исключает возможность разрешения рассматриваемых дефектов как отдельных объектов. Характерно, что увеличение зазора приводит к «сглаживанию» графиков выходного сигнала главным образом за счет уменьшения их максимумов, тогда как величина локальных минимумов уменьшается незначительно, а величина сигнала на периферии графиков даже несколько возрастает, что отражает проявление краевых эффектов при увеличении зазора «зонд-образец» и «расширение» за счет этого зоны чувствительности сканирующего зонда Кельвина.

Заключение

1. Показано, что разрешающая способность сканирующего зонда Кельвина в большей мере определяется зазором «зонд-образец», чем геометрическими размерами его чувствительного элемента. Так, при зазоре d в 10 раз меньшем, чем диаметр чувствительного элемента D , применение преобразователя с отношением сигнал/шум 80 дБ позволяет разрешать дефекты, отстоящие друг от друга на расстояние $0,001 D$ и более.

2. Обнаружено, что увеличение зазора «зонд-образец» свыше $0,1 D$ ведет к резкому уменьшению величины выходного сигнала сканирующего зонда Кельвина, и, следовательно, к падению чувствительности измерительного преобразователя и увеличению погрешности, связанной с наличием собственных шумов преобразователя.

2. Показано, что повышению разрешающей способности сканирующего зонда Кельвина, работающего в режиме вибрирующего конденсатора, за счет уменьшения зазора «зонд-образец» препятствует сильная дистанционная зависимость чувствительности зонда от зазора, в наибольшей степени проявляющаяся при малых зазорах. Исключить погрешность измерения, вызванную проявлением данного эффекта, можно только при нулевой амплитуде вибрации d_m чувствительного элемента.

Таким образом, предлагаемая математическая модель позволяет определить предельно

достижимую пространственную разрешающую способность сканирующего зонда Кельвина, зная геометрические параметры его чувствительного элемента и отношение сигнал/шум электронной схемы преобразователя. Повышение разрешающей способности сканирующего зонда Кельвина может быть обеспечено за счет уменьшения зазора «зонд-образец», однако при этом лимитирующим фактором становится амплитуда вибрации чувствительного элемента.

Список использованных источников

1. Klein, U. Contact potential differences measurement: Short history and experimental setup for classroom demonstration / U. Klein, W. Vollmann [et al.] // IEEE Transactions on Education. – 2003. – № 46(3). – P. 338–344.
2. Cheran, L. Scanning Kelvin nanoprobe detection in materials science and biochemical analysis / L. Cheran, S. Sadeghi [et al.] // The Analyst. – 2005. – № 130. – P. 1569–1576.
3. Ouisse, T. Theory of electric force microscopy in the parametric amplification regime / T. Ouisse, M. Stark [et al.] // Physical Review. – 2005. – B. 71 (20). – Art. No. 205404.
4. Cheran, L. Work-function measurement by high resolution scanning Kelvin nanoprobe / L. Cheran, S. Johnstone [et al.] // Measurement Science and Technology. – 2007. – № 18. – P. 567–578.
5. McMurray, H.N. Probe diameter and probe-specimen distance dependence in the lateral resolution of a scanning Kelvin probe / H.N. McMurray, G. Williams // Journal of Applied Physics. – 2002. – V. 91. – № 3. – P. 1673–1679.
6. Иродов, И.Е. Основные законы электромагнетизма / И.Е. Иродов. – 2-е изд. Учебное пособие для студентов вузов. – М.: Высш. шк., 1991. – 289 с.
7. Zharin, A. L. Contact Potential Difference Techniques as Probing Tools in Tribology and Surface Mapping / A.L. Zharin // Scanning Probe Microscopy in Nanoscience and Nanotechnology (edited by B. Bhushan). – Springer Heidelberg Dordrecht London New York, 2010. – P. 687–720.
8. Taylor, D.M. Measuring techniques for electrostatics / D.M. Taylor // Journal of Electrostatics. – 2001. – № 51–52. – P. 502–508.
9. Jacobs, H.O. Surface potential mapping: A qualitative material contrast in SPM / H.O. Jacobs, H.F. Knapp, S. Miiller, A. Stemmer // Ultramicroscopy. – 1997. – № 69. – P. 39–49.
10. Baikie, I.D. Analysis of stray capacitance in the Kelvin method / I.D. Baikie [et al.] // Rev. Sci. Instrum. – V. 62. – № 3. – 1991.

Тявловский А.К.

Mathematical modeling of a distance dependence of a scanning Kelvin probe lateral resolution

A mathematical model of cylindrical shaped plane-ended scanning Kelvin probe output signal is proposed considering the case of an infinite plane sample's surface with local defects represented by dot charges. Modeling results were obtained for the case of two closely situated dot charges and different combinations of scanning Kelvin probe tip's diameter and sample-to-probe gap. It was found that the most effective way to improve the lateral resolution of a scanning Kelvin probe is to reduce the sample-to-probe gap in line with the reduction of sensor's vibration amplitude. (E-mail: andrey_psf@tut.by)

Key words: Kelvin probe, lateral resolution, method of images, electric charge.

Поступила в редакцию 17.02.2012.